



XXII SIMPOSIO DEL GRUPO ESPECIALIZADO DE CRISTALOGRAFÍA Y CRECIMIENTO CRISTALINO: CENTENARIO DE LA DIFRACCIÓN DE LAUE

SEVILLA, 26 - 29 DE JUNIO DE 2012

MARTES 26 DE JUNIO

18:30 - 20:30 Inscripción ([Sede del Rectorado, Patio 2](#)).

19:00 - 19:15 Acto de apertura y bienvenida ([Sede del Rectorado, Paraninfo](#)).

Sesión Inaugural. Moderador: Fernando J. Lahoz

19:15 - 20:00 **I-1** Conferencia Inaugural. **Martín Martínez Ripoll**, Instituto De Química-Física Rocasolano, CSIC-Madrid. "Rayos x, cristales, estructuras... ¿Una historia interminable? ¿Alguien se acuerda?"

20:00 a 21:30 Coctel de bienvenida ([Sede del Rectorado, Patio 2](#)).

MIÉRCOLES 27 DE JUNIO

Inscripción abierta durante todo el día ([Sede del Pabellón de México](#)).

Sesión I. Moderador: Avelino Martín Alonso

~~09:00 - 10:00 **I-2** Conferencia Plenaria. **Ernesto Carmona Guzmán**, Instituto de Investigaciones Químicas, CSIC-Universidad de Sevilla. "Complejos con enlace metal-metal, simple o múltiple" **CANCELADA**~~

09:00 - 10:00 **I-2** Conferencia Plenaria. **Pedro J. Pérez**, CIQSO - Universidad de Huelva. "Catalytic procedures for C-C, C-N and C-O bond-formation: when X-ray studies make the difference"

10:00 - 10:15 **O-1 Oscar Fabelo Rosa**, ICMA, CSIC - Universidad de Zaragoza; ILL, Grenoble-France. "The role of disorder-order transitions in the Quest for molecular multiferroics: neutron studies of a mixed valence iron(II)-iron(III) formate framework"

10:15 - 10:30 **O-2 Pilar García-Orduña**, ISQCH, CSIC - Universidad de Zaragoza. "Structural parameters and catalytic activity of half-sandwich late transition metal complexes"

10:30 - 10:45 **O-3 Miguel Quirós**, Universidad de Granada “Searching the crystallography open database by definition of molecular fragments.”

10:45 - 11:30 PAUSA CAFÉ CON SESIÓN DE POSTERS

Sesión II. Moderador: Jorge Pasan García

11:30 - 12:00 **S-1** Conferencia de Sesión. **Begoña Bazán Blau**, Universidad del País Vasco. “MOFs porosos: “tallando” el espacio en arquitecturas supramoleculares“

12:00 - 12:15 **O-4 Juan Manuel Pérez Mato**, Universidad del País Vasco. “Non-uniform variation of the unit cell in a series of modular compounds: a stringent evidence of alternate cation/anion occupational modulations”

12:15 - 12:30 **O-5 Eva Fernández Zapico**, Universidad de Oviedo- CINN. “Tres nuevos complejos de níquel con ácido 2,5-piridin-dicarboxílico y fenantrolina: análisis estructural, térmico y de fluorescencia”

12:30 - 12:45 **O-6 Laura Cañadillas-Delgado**, ICMA, CSIC – Universidad de Zaragoza. “Temperature and pressure studies at the very intense vertical axis Laue neutron diffractometer (Vivaldi) of $\text{Fe}(\text{pmd})_2[\text{Ag}(\text{CN})_2]_2$ (pmd=pyrimidine)”

12:45 - 13:15 **S-2** Conferencia de Sesión. **Marta E. G. Mosquera**, Universidad de Alcalá. “Síntesis de redes metalorgánicas de Zn(II) con grupos amino no coordinados y estudio de su funcionalización post-síntesis“

13:30 A 15:30. ALMUERZO, RESTAURANTE LOS MONOS

15:30 -16:30 Mesa Redonda de Cristalografía e I + D + i.

Coordinador: **Santiago García-Granda**, Universidad de Oviedo.

Ponentes: **Guillermo Monrós Tomás**, Universidad Jaume I. **Alfonso García Caballero**, LEC, IACT – CSIC, Universidad de Granada. **José Manuel García Fernández**, IIQ-CSIC, Universidad de Sevilla. **José Santiso López**, CIN2-Barcelona.

Sesión III. Moderadora: Karmele Urtiaga Greaves

16:30 - 16:45 **O-7 Margarita Gómez González**, IIQ, CSIC-Universidad de Sevilla. “Towards the synthesis of a koelsch-type tri-radical: a structural study of intermediates and precursors”

16:45 - 17:00 **O-8 Oriol Vallcorba**, ICMB. “TALP, a multisolution direct-space strategy for solving molecular crystals from powder diffraction data based on restrained LS.”

17:00 A 17:30. PAUSA CAFÉ CON SESIÓN DE POSTERS

- 17:30 - 17:45 **O-9 Jesús Campos Manzano**, IIQ, CSIC-Universidad de Sevilla. "Synthesis of a cationic platinum(II) alkylidene complex and X-ray characterization of related compounds derived from reactivity studies"
- 17:45 - 18:00 **O-10: Carina Santos-Hurtado**, IIQ, CSIC-Universidad de Sevilla. "Koelsch's persistent free radicals joined together ferrocenium ion to be used as DNP agents in NMR. Structural Study of their precursors"
- 18:00 - 19:00 Presentación Flash de Posters
- 19:45 - 20:00 Concentración en la puerta del León, entrada actual al Real Alcázar de Sevilla para comenzar la visita programada. A continuación visita guiada al vecino Barrio de Santa Cruz (antigua Judería de Sevilla).

JUEVES 28 DE JUNIO

Inscripción abierta durante todo el día ([Sede del Pabellón de México](#)).

Sesión IV. Moderador: Francesc Piniella Febrer

- 09:00 - 10:00 **I-3 Conferencia Plenaria José Santiso López**, CIN2-Barcelona. "Estructura de interfases coherentes en películas epitaxiales de óxidos de tipo perovskita"
- 10:00 - 13:00 **Sesión "bio" paralela, Aula-2 del Pabellón de México:** Taller de análisis y predicción de complejos proteína-ligando (usando los programas Gold y Relibase de la CCDC)
- 10:00 - 10:15 **O-11 Alberto J. Fernández Carrión**, ICMSE-CSIC, Universidad de Sevilla. "Apparent Bulk Thermal Expansion Coefficient for Rare Earth Disilicates"
- 10:15 - 10:30 **O-12 Santiago García Granda**, Universidad de Oviedo. "Light-emitting lanthanide based organic-inorganic hybrids"
- 10:30 - 10:45 **O-13 Aurelio Cabeza Díaz**, Universidad de Málaga. "Multifunctional 3d lanthanide carboxyphosphonates: proton conductivity and luminescence properties"
- 10:45 - 11:00 **O-14 Pau Díaz Gallifa**, Universidad de La Laguna. "Difracción de Neutrones en un nuevo complejo metamagnético [Co₂(cbut)(H₂O)₃]_n (H₄cbut = ácido 1,2,3,4-ciclobutanotetracarboxílico)"

11:00 - 11:30. PAUSA CAFÉ CON SESIÓN DE POSTERS

Sesión V. Moderadora: Teresa Calvet Pallás

- 11:30 - 12:00 **S-3 Conferencia de Sesión Angel Justo Erbez**, ICMSE-CSIC, Universidad de Sevilla. "La difracción de rayos-x con incidencia rasante (GIXRD) empleando espejos multicapas: una herramienta útil para el estudio de muestras del patrimonio"
- 12:00 - 13:00 Presentación Flash de Posters

13:00 - 13:30 Presentación de La web del GE3C

13:30 - 15:30 ALMUERZO, RESTAURANTE LOS MONOS

Sesión VI. Moderadora: Celia Maya Díaz

15:30 - 16:15 **I-4** Conferencia Plenaria **Inés G. Muñoz**, CNIO - Madrid. "Two rings for folding: crystal structure of the mammalian chaperonin cct in complex with tubulin"

16:15 - 16:30 **O-15 José Ignacio Baños Sanz**, IQFR – CSIC, Madrid. "Exploring the conformational changes in inositol 1, 3, 4, 5, 6-pentakisphosphate 2-kinase"

16:30 - 16:45 **O-16 Carmela García Doval**, CNB – CSIC, Madrid. "Crystal structures of the receptor-binding c-terminal domain of bacteriophage T4 and T7 tail fibres"

16:45 - 17:00 **O-17 Javier Gutiérrez Fernández**, IQFR – CSIC, Madrid. "Choline binding proteins attachment to the streptococcus pneumoniae cell wall"

17:00 - 17:30 PAUSA CAFÉ CON SESIÓN DE POSTERS

Sesión VII. Moderador: Armando Albert de la Cruz

17:30 - 18:15 Conferencia Plenaria. I-5 Jerónimo Bravo Sicilia, Instituto de Biomedicina de Valencia, CSIC. "Estructura y función del dímero Rbg1/Tma46"

18:15 - 18:30 **O-18 Ana Cámara Artigas**, Universidad de Almería. "The role of water molecules in protein-protein interactions: a little help from the crystal polymorphism and non-crystallographic symmetry"

18:30 - 18:45 **O-19 Antonio Chaves Sanjuan**, IQFR – CSIC, Madrid "Regulation of an arabidopsis thaliana potassium channel"

18:45 - 19:00 **O-20 Celia Maya Díaz**, IIQ, CSIC-Universidad de Sevilla. "Estudio mediante difracción de rayos x de los procesos de transferencia electrónica que implican a la proteína fpr de rhodobacter capsulatus"

21:30. CENA DEL CONGRESO: RESTAURANTE LOS SEISES

VIERNES 29 DE JUNIO.

(Sede del Pabellón de México).

Sesión VIII. Moderadora: Sol López Andrés

09:00 - 10:00 **I-6** Conferencia invitada **Cristóbal Viedma Molero**, Universidad Complutense - Madrid. "Rotura de la Simetría en Cristalización Quiral y Crecimiento No-Clásico. Implicaciones en la Industria Farmacéutica y en el Origen de la vida.

10:00 - 10:15 **O-21 Miguel A. Duran Olivencia**, LEC, IACT - CSIC – Universidad de Granada. “A proposed Langevin equation for nucleation”

10:15 - 10:30 **O-22 Jaime Gómez Morales**, LEC, IACT - CSIC – Universidad de Granada. “Crystallization of biomimetic citrate-functionalized apatite nanoparticles with tailored carbonate content”

10:30 - 10:45 **O-23 Francisco Javier Martinez Casado**, LEC, IACT - CSIC – Universidad de Granada. “Crystallization of Nanocrystalline Apatites Doped with Transition Metals.”

10:45 A 11:30. PAUSA CAFÉ

Sesión IX. Moderador: Fermín Otálora Muñoz

11:30 - 11:45 **O-24 Sol López Andrés**, Universidad Complutense - Madrid. “Caracterización estructural y morfológica de γ -alúmina obtenida a partir de un residuo de aluminio”

11:45 - 12:00 **O-25 Alfonso García Caballero**, LEC, IACT - CSIC – Universidad de Granada. “The crystallisation factory: an integrated platform of crystallisation and x-ray structure determination”

12:00 -13:55. Asamblea general del GE3C

13:55 - 14:00. Clausura del simposio

14:00 - 16:00. ALMUERZO DE DESPEDIDA
